
连续4年空缺的国家自然科学一等奖，被他们拿下了！

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/42525.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

连续4年空缺的国家自然科学一等奖，被他们拿下了！。

编者按

2026年，国家自然科学奖迎来70周年。从1956年以中国科学院科学奖金为名首次颁发，到1982年正式更名为国家自然科学奖，作为五大国家科学技术奖之一，它代表着我国自然科学领域的最高荣誉。

时值庆祝中国共产党建党105周年之际，中国科学院档案馆联合中国科学报社、中国科学院相关获奖院属单位，推出《七秩荣光——档案里的国家自然科学奖》专栏，以档案为凭，回溯以中国科学院为第一完成单位的国家自然科学奖一等奖项目，彰显科学价值，重现时代回响，致敬为我国自然科学事业作出卓越贡献的科学家们。

本期获奖课题

2002年度一等奖

“物理有机化学前沿领域两个重要方面——有机分子簇集和自由基化学的研究”

本期档案



▲蒋锡夔（左）与计国桢讨论工作照。

物理有机化学是有机化学的理论基础。
它主要涉及结构、环境和特性、物理特性(与谱学)之间的关系。我们五十余^{化学}人二十余年大部分工作便是围绕这一主题的深入系统研究。它包括两大部分,即: 1. 有机分子的簇集和自集, 2. 自由基化学里的自旋离域因素。

P.2. "大爆炸"后,出现了宇宙,又出现了水和有机分子,从而出现了HLI, HLI又导向生命的出现。为什么?最简单、典型的生命是细胞。它的存在又依赖于细胞膜, ^而膜的生命成^正依赖于HLI。为何这些^{直接}碳氢链基本上是平行排列的? 要为此提供一个最简单、最基础的模型,那就得^{深入系统地}研究,和理介HLI驱动的簇集现象。

P.3. HLI除了导致生命现象的疏集外,它还会^{直接}影响有机分子的化学、谱学的特性,也是超分子化学最简单模型。

因此必须深入系统的研究。

P.4. 为了定异地测出各种分子在各种环境下的"簇集(自集)倾向性,我们系统、大量地测定了它的 ΔC_{H2} 值。^{或称 ΔC_{H2} 值}
科学 Δ 成长,必须通过创新 Δ 概念 Δ 发展。我们提出并验证了这^{重要的}几个概念。add: 动脉硬化与簇集他^有关?

P.5. HLI可促使大环的形成。 $>10-12 \text{ CH}_2$

国家科学技术奖励推荐书

(适用于国家自然科学奖、技术发明奖、科技进步奖)

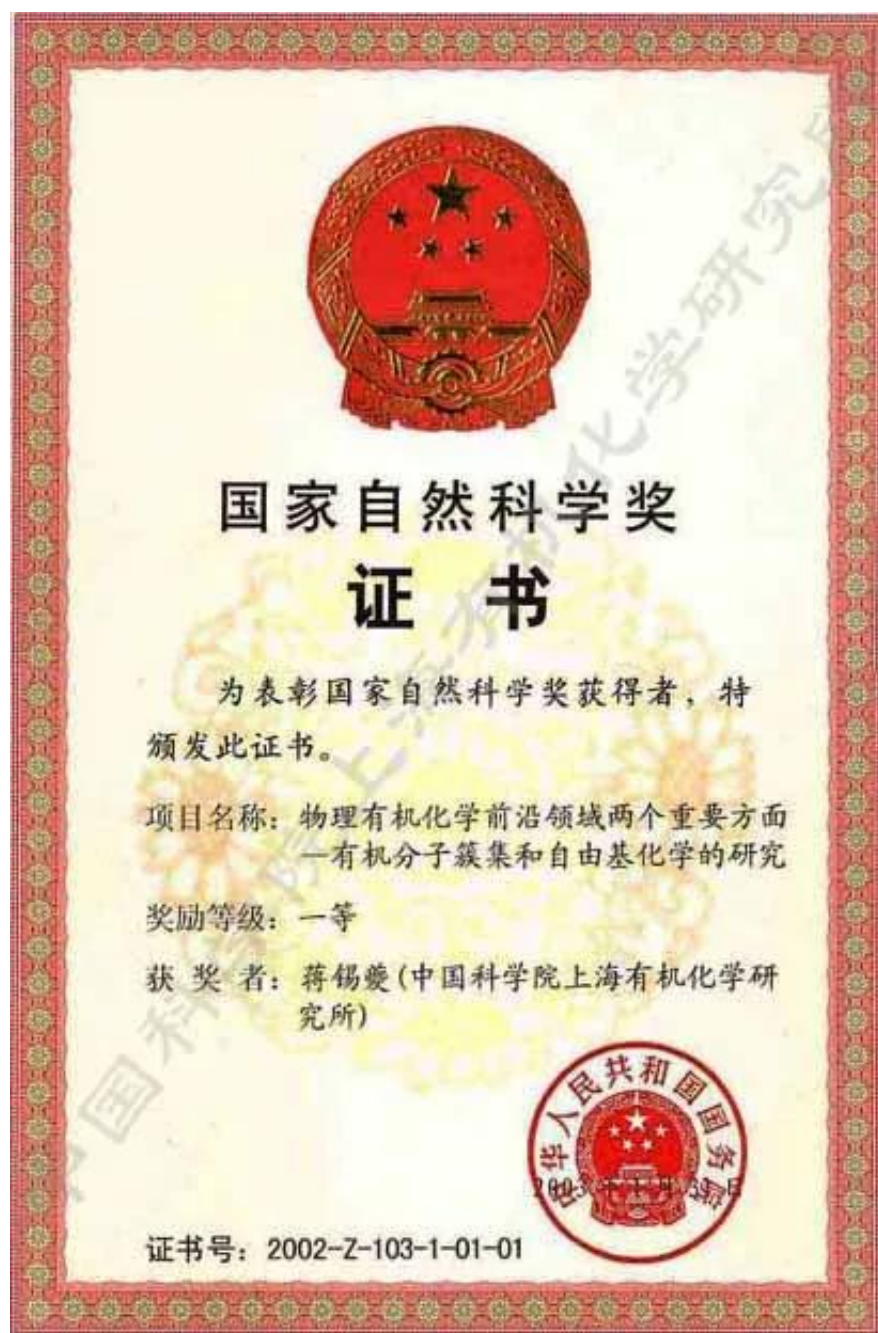
一、项目基本情况

奖种：国家自然科学奖 学科(专业)评审组代码：103 序号： 编号：

项目名称	中文	物理有机化学前沿领域两个重要方面-有机分子簇集和自由基化学的研究		
	英文	Two important frontiers of physical organic chemistry: aggregation of organic molecules and radical chemistry		
主要完成人	蒋锡夔、计国桢、张劲涛、范伟强、史济良			
主要完成单位	中国科学院上海有机化学研究所			
推荐单位 (或专家) (盖章)	中国科学院	项目名称可否公布	可	
		密级及保密期限	无	
主题词	物理有机化学, 有机分子簇集, 自由基化学, 取代基自旋离域参数			
学科(专业) 分类名称代 码	(物理有机化学-1502060)	所属国民经济行业	N,	
任务来源	A,D,			
计划(基金) 名称和编号	D: 国家自然科学基金重大项目 《物理有机化学前沿领域两个重要方面——有机分子的簇集和自由基化学的研究》 编号: 29392200, 1993-10-01 至 1996-12-31 A: 国家 973 项目 《分子间弱相互作用本质和规律》 编号: G2000078101 2000-10-01 至 2004-12-31			
项目起止时间	起始: 1981-01-01	完成: 2000-12-31		

国家科学技术奖励工作办公室制

▲国家自然科学奖推荐书首页。



▲“物理有机化学前沿领域两个重要方面——有机分子簇集和自由基化学的研究”获国家自然科学奖一等奖的证书。

本期档案由中国科学院上海有机化学研究所提供

文章内容 作者：袁小华（中国科学报社）、蔡正骏（中国科学院上海有机化学研究所）

2003年2月，2002年度国家自然科学奖正式揭晓。

摘得一等奖的，是中国科学院上海有机化学研究所（以下简称上海有机所）蒋锡夔院士领衔的课题组。

这一届的一等奖格外牵动人心——此前，这一奖项已连续4年空缺。大家翘首以待：下一次能配得上这份至高荣誉的，究竟会是怎样的成果？

这一获奖项目有个长长的名称：“物理有机化学前沿领域两个重要方面——有机分子簇集和自由基化学的研究”。顾名思义，这项研究在两个前沿方向同时取得了原始突破——一方面揭示了有机分子簇集与解簇集的宏观变化规律，另一方面建立了自由基取代基自旋离域的微观参数体系。二者相互印证，共同回答了“分子为什么这样行动”的关键科学问题，为理解复杂生命体系的有机分子作用机制提供了重要理论支撑。

更让人感慨的是，这项历时二十余年的研究，累计投入经费不足300万元，最困难时连基础的荧光测量设备都添置不起，但团队仍坚持完成大量系统实验验证，最终取得国际水准的原创成果。

他们如何筚路蓝缕开辟新的方向，又凭何拿下这空缺已久的一等奖？

01 平息一场持续数十年的争论

自由基化学和有机分子簇集研究是蒋锡夔及其团队攀上的两座学术高峰，其中自由基化学这座高峰的起点，埋在蒋锡夔早年那段为国攻关的岁月里。

1955年，蒋锡夔冲破重重阻碍，从美国归来。此后近二十年，他把主要精力投入国防急需的有机氟材料攻关。1959年，他带领团队成功合成单体，研制出中国第一块氟橡胶，为相关国防工程提供了关键材料。

尽管已经做出不少“有用的研究”，蒋锡夔却始终心念那些看似“无用”的基础探索。1970年代初，上海有机所成立基础理论研究小组，这是中国科学院系统内第一家以“基础研究”命名的研究组。1973年2月，小组正式定名“608组”，蒋锡夔任组长，计国桢任副组长。

理论组一成立，蒋锡夔就把方向定在他最熟悉的含氟烯烃上。他早年潜心攻关的杰出成果——氟橡胶、氟塑料的合成，起点正是含氟烯烃。

含氟烯烃的聚合反应，其本质是自由基反应。自由基是含有一个未成对电子的原子、分子或离子。落单的电子总是倾向于寻找另一电子配对，自由基化学性质由此显得格外活泼。

当时学界最关心的是：如何定量衡量自由基的活性？分子上不同的取代基团，有的吸电子、有的推电子，会怎样改变自由基生成的难易？

此前成熟的办法是将取代基效应量化为参数，用于预测化学反应。物理有机化学的重要奠基人哈米特为离子型反应搭建的参数，已被学界沿用数十年。但自由基是另一类反应中间体，其稳定性同时受极性效应和自旋离域效应影响。

当时有人争论，既然许多自由基反应仅靠极性参数就能解释，那自旋离域效应究竟该不该纳入参数体系？加拿大阿尔伯塔大学的泰内尔就曾断言，极性参数关联不佳，根源在于实验精度不足，而无需考虑自旋离域效应。与此同时，另一些科学家则在思考：能否找到一套只反映自旋离域能力、与极性无关的可靠参数？这也成为许多自由基化学家长久追逐的目标。

1981年5月，计国桢从德国进修归来，跟随蒋锡夔投入自由基化学研究。早年深耕含氟化合物打下的功底，让蒋锡夔和计国桢留意到三氟苯乙烯。这种分子结构特殊，刚好可以区分极性效应和自旋离域效应，是理想的模型体系。

团队先采集取代三氟苯乙烯的氟核磁数据，建立国内首套实验实测的哈米特型极性参数；再合成32个极性各异的取代三氟苯乙烯，在不同温度下测量热环化二聚反应速率，依靠双参数方程，逐步拆分极性效应与自旋离域效应。

蒋锡夔定下的数据采集标准近乎苛刻：别人研究自由基反应，大多等到转化率约10%就采样收数，他却要求覆盖5%至95%的完整反应区间。单个参数还要在四五个不同温度下反复验证，以此确保结果可靠。课题需要上千个这类实验数据，而有的实验，一次就要持续几天。

1992年，计国桢等发展出一套既完整又可靠的自由基自旋离域参数 σ_{JJ} ·（“JJ”代表的是蒋锡夔和计国桢姓名拼音的第一个字母），相关成果发表在美国《有机化学杂志》（The Journal of Organic Chemistry）。审稿人高度评价这一工作，认为这是自由基化学研究中的一个里程碑，也

是今后国际同行应该采用的标准参数。

至此，领域内争论已久的问题第一次有了可靠回答：许多自由基反应仅靠极性参数就能解释，是因为其自旋离域效应权重本就很小，而非自旋离域效应本身不重要；更重要的是，自旋离域效应是能够被单独量出来的。

团队还进一步用双参数方程系数比值作为判别尺度，将自由基反应分为四种类型，让后来者面对新体系时，能直接判断该用极性参数还是双参数描述。

02 “香味传遍了整个有机化学界”

“如果说科学是一个大图书馆，我们的研究不过是其中两片纸。”获奖后，蒋锡夔在接受媒体采访时说。其中的另一片纸，就是有机分子簇集研究。

在解释这项研究的价值时，蒋锡夔说：“它很重要，直接关系到生命的形成以及很多疾病的产生，将来很有可能由此产生很多新的药物。”

这项研究诞生于一次实验中观察到的反常现象。

上世纪80年代初，研究生范伟强在一次实验中发现：长链酯水解反应中，碳链增长到一定长度后，水解速率会骤降几个数量级，而不是平缓减弱。蒋锡夔没有简单将其归为实验误差，而是让范伟强检索文献。果然，美国化学家门格在一篇文章里提到了一些长链分子在水中会“簇集”，但没有深究下去。

簇集二字，形象地描述了带着碳氢长链的有机分子一旦到了水里，就会彼此靠拢、抱团的样子；把它们往一起拽的，是一种叫“疏水亲脂相互作用（HLI）”的弱作用力。

蒋锡夔决定让范伟强接着往下做。他在随笔中写下对这一方向的长远判断：“HLI除了是生命现象的源泉外，它还会直接影响有机分子的化学特性和谱学特性，簇集现象也是超分子化学的简单模型。”一个始于意外发现的课题，就此正式铺开：疏水亲脂相互作用引发的有机分子簇集与自卷。

此后，蒋锡夔团队提炼出一系列可测量的原创概念：簇集、分子自卷曲、临界簇集浓度、溶剂促簇效应……为理解这类基础分子行为搭建起关键理论框架。

最先用上这套概念来解释的，是一道血管谜题。

血液里的胆固醇酯如果过度“抱团”，就会层层沉积在血管壁，形成斑块、堵塞血管，这就是人们熟知的动脉粥样硬化，心梗和中风便由此而来。研究发现，上述斑块内胆固醇油酸酯、亚油酸酯的占比分别高达32%、35%；与之碳链长度相当的胆固醇硬脂酸酯，却只占2%，很少参与聚集。

蒋锡夔团队的理论能很好地解释这一现象：硬脂酸酯那条18个碳的饱和碳链，在疏水亲脂作用下会“像小姑娘的头发一样鬈曲”，向内蜷缩成团、隐匿起来，因此无法参与斑块的聚集——这是人类首次借助物理有机理论，从分子层面建立起动脉粥样硬化与分子共簇集倾向之间的直接关联。

簇集这条线，是一群人接力做出来的。范伟强读博期间，就以第一作者身份在国际顶级刊物《美国化学会志》（JACS）上接连发表三篇论文，“在国内有机化学界引起轰动”；张劲涛博士深耕解簇集现象，取得关键突破，后来与蒋锡夔一同完成专著《有机分子的簇集和自卷》；研究员史济良系统探究有机分子簇集行为、共簇集诱发的电子转移，产出一系列研究成果。

很难想象，这一系列成果是在并不宽裕的实验室条件下完成的。蒋锡夔只能将样品逐个打包，安排学生一次次北上，前往中国科学院感光化学研究所（该所后来并入中国科学院理化技术研究所）佟振合院士的实验室“借光”测试。这般来回奔波，一晃便是十余年。

1987年，美国《化学研究评述》（Accounts of Chemical Research）向蒋锡夔发出邀请，希望他系统阐述有机分子簇集与自卷曲领域的研究成果。能在这本化学领域极具影响力的综述性刊物上为原创研究方向立言，不仅是对蒋锡夔多年深耕的学术肯定，更标志着我国在物理有机前沿方向获得国际同行高度认可。9年后的1996年，蒋锡夔再获该刊邀请，撰文总结自由基自旋离域效应的系列工作。

回头再看，蒋锡夔团队深耕的两个研究方向乍看毫无交集：一个关注水中成群聚集的分子（簇集与自卷），一个聚焦分子上孤悬的单个电子（自由基）。

但实际上，它们共同回答了物理有机化学中一个长久存在的核心问题：分子所处环境及其结构，究竟如何共同决定其行为？二者互为补充，共同揭示分子行为的底层逻辑，帮助人们从分子层面理解化学反应与生命过程的规律。

这两项研究，既像是大图书馆中的两页纸，也像姹紫嫣红的大花园中的两朵花，虽然只是小花，但“香味也传遍了有机化学界”。

03一评再评，终获一等奖

这两项工作的核心成果早在20世纪90年代初就已公开发表。

面对重大突破，蒋锡夔并未急于申报奖项，而是始终相信“检验我们实验结果的，将是时间”。他持续补充数据、反复验证，历时近十年完善体系。到21世纪初，团队整合二十余年研究积累，正式申报国家自然科学奖。

2002年4月22日，蒋锡夔与计国桢赶赴北京，参加化学组项目答辩。答辩结束，投票几乎一边倒：22位评审专家，21票支持一等奖。

初评通过，项目进入公示征求意见阶段。鉴于一等奖已空缺4年，国家科学技术奖励工作办公室对待评审极其审慎，特意为这份申报增设了一道特别程序，邀请中国香港与国际顶尖同行评议。1位中国香港教授、1位加拿大教授，再加上4位美国学者，6位国际同行给出高度一致的评价：这项研究在国际上得奖都没问题。

之后，奖励办又组建跨学科院士专家组奔赴上海实地考察。2002年7月14日，由时任北京大学校长、中国科学院副院长许智宏担任组长的专家组来到上海有机所听取汇报，研究工作再次获得充分肯定。

9月2日，蒋锡夔团队迎来了最后一关——大评委会答辩。评审委员会由32人组成，时任科技部副部长程津培担任主席。会上，蒋锡夔作了约二十分钟的成果汇报，顺利通过答辩。当天，他在日记里写下这样一句感慨：“This should be ‘皆大欢喜’的一天！”

2003年1月10日，国家科学技术奖励委员会完成审定：2002年度唯一一项国家自然科学奖一等奖，授予蒋锡夔、计国桢、张劲涛、范伟强、史济良。评审专家认为，该项研究具有重要的原始创新性，对物理有机化学及相关学科有重要推动意义，成果受到国内外同行高度重视，属国际领先水平。

二十余年的科研长跑，换来了丰厚的果实。蒋锡夔等人在国内外期刊发表论文120余篇、出版专著1部，应邀在国际会议和海外学术机构作报告120余场。更深远的影响，还在实验室之外：他们提出的簇集与解簇集概念，为药物分子设计、抗动脉粥样硬化新药筛选打开了一扇门；他们建立的自旋离域参数，也被海内外众多同行采纳，用于各自的研究。

在上海有机所，流传着一个“猎兔理论”：一支成熟的科研团队，既要有经验丰富、视野宏阔的人来“指兔子”，也要有精通实验手段的人去“打兔子”，还要有人负责“捡兔子”。蒋锡夔便是那个“指兔子”的人——他擅长登高望远，捕捉学科前沿的生长点。

这份桂冠，也同时属于许许多多幕后英雄。除了获奖名单上的5人，还有很多未被一一署名的研究生，一同接力奔跑二十余年。蒋锡夔将一等奖奖金分给参与项目的数十位成员，自己仅留下很少一部分。在他看来，作为一名从事基础理论研究的科研工作者，科研成就带来的喜悦远胜于物质回报。

蒋锡夔常说，拿“有没有用”来衡量科学是很大的错误，基础研究大都源于好奇心，看起来没用的，最后可能变成最有用的。而时间，将对一切有价值的努力报以最公正的回答。

（支持单位：中国科学院上海有机化学研究所）

参考资料：

1.史炎均编著：《真善合美——蒋锡夔传》，上海交通大学出版社、中国科学技术出版社联合出版

2.黎占亭著：《蒋锡夔》，金城出版社

3.黄辛：《蒋锡夔：理想照亮命运》，发表于《中国科学报》

4.张懿：《还原当年蒋锡夔院士带领团队“猎兔”的经过》，发表于《文汇报》

5.许琦敏：《“指兔子”的那位科学家走了》，发表于《文汇报》

6.《蒋锡夔：半个世纪科学梦》，发表于《科技日报》

作者：袁小华，蔡正骏 来源：中国科学报

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发